

УДК 551.511+004.94

**МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РАСПРОСТРАНЕНИЯ ПРИМЕСЕЙ
В БЛИЖНЕЙ ЗОНЕ С УЧЕТОМ ЛОКАЛЬНЫХ
МЕТЕОРОЛОГИЧЕСКИХ УСЛОВИЙ**

© Шаповалов В.А.

Высокогорный геофизический институт, г. Нальчик

В работе представлена разработанная автором региональная численная модель, которая описывает изменение со временем термодинамических и микрофизических характеристик атмосферы в расчетной области, распространение примесей в регионе от различных источников с учетом исходных фактических или прогнозных полей метеорологических параметров. Использование данных инструментальных измерений и прогнозной системы GFS позволяет получать детальный анализ экологической обстановки в исследуемом районе.

***Ключевые слова** математическое моделирование, перенос примесей, локальные условия, распространение загрязнителей, поля метеорологических параметров.*

Вопросы переноса легких и газообразных примесей в облачной атмосфере на десятки и сотни километров, их осаждения и вымывания, представляют большой интерес в современных условиях, в свете участвовавших случаев возникновения кратковременных техногенных источников вредных веществ большой мощности.

Исследования распространения примесей включают проведение полевых экспериментов, разработку способов краткосрочного прогноза загрязнения атмосферы, развитие методов моделирования распространения примесей. По этим вопросам достигнуты существенные результаты [3, 5]. В первую очередь это относится к теоретическим исследованиям распространения примесей в атмосфере и расчетам загрязнения воздуха, внедрению научных разработок в практику контроля за чистотой атмосферы, разработке методов краткосрочного прогноза опасных с точки зрения загрязнения атмосферы метеорологических условий. Таким образом, исследование распространения примесей в атмосфере с помощью математического моделирования является одним из перспективных развивающихся направлений и имеет важное прикладное значение для охраны окружающей среды, физики атмосферы и для многих других сфер. Построение математических моделей распространения атмосферных примесей позволяет исследователям решать широкий спектр задач, в том числе, изучать региональные особенности загрязнения окружающей среды. В тоже время создание региональных моделей, позволяющих достаточно корректно описывать распространение примесей представляет наибольшую сложность. Несмотря на широкий спектр существующих моделей распространения примесей [2, 13], многообразии условий

окружающей среды диктует необходимость в создании моделей, учитывающих влияние множества дополнительных факторов при распространении примесей, таких как метеорологические условия и рельеф. В частности, эта проблема требует дальнейшего развития для регионов с широким спектром местных особенностей и локальных условий [3]. Совершенствованию численных методов прогноза способствует более полный учет физических и химических атмосферных процессов, определяющих загрязнение атмосферы. Причем, чем более точными и полными данными оперируют модели, тем более точные прогнозы можно получить.

Для прогноза загрязнения атмосферного воздуха от группы источников часто используют метод численного интегрирования уравнения атмосферной диффузии. Данный подход предполагает решение уравнения турбулентной диффузии примеси с учетом нестационарного члена

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} = k_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + k_y \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + \frac{\partial}{\partial z} k_z \frac{\partial C}{\partial z} + S(x, y, z), \quad (1)$$

для начальных и граничных условий $q=0$ при $t=0$, $k_z \frac{\partial C}{\partial z} = 0$ при $z=0$ и $z = H$.

Уравнение решается численно без учета начального подъема примеси. Таким образом, реализация решения заключается в непосредственном интегрировании нестационарного трехмерного уравнения диффузии для определения ожидаемой концентрации примеси в интересующих точках с учетом конкретной площади размещения источников.

Отличительными признаками расчетов по исследованию загрязнения воздуха и почвы на больших расстояниях является необходимость учета следующих процессов [62]:

- выпадения примесей на подстилающую поверхность;
- вымывания с дождями и туманами;
- преобразования примесей при длительном нахождении их в воздухе.

Разработанная автором региональная численная модель описывает изменение со временем термодинамических и динамических характеристик атмосферы в расчетной области, распространение примесей в регионе от стационарных источников с учетом исходных фактических или прогнозных полей метеорологических параметров. Модель включает систему уравнений гидротермодинамики для описания региональных атмосферных процессов, аналогичную представленной в [6,9] и уравнения для скорости измерения концентрации многокомпонентных газовых примесей следующего вида [1]:

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} + u_j \frac{\partial C_i}{\partial x_j} = F_i^{gas} - P_i^{nucl} - P_i^{cond} + P_i^{phot} + \frac{\partial}{\partial x_j} K_{jj} \frac{\partial C_i}{\partial x_j}, \quad (2)$$

$$\frac{\partial \varphi_k}{\partial t} + (u_j - \delta_{j3} w_g) \frac{\partial \varphi_k}{\partial x_j} = F_k^{aer} + P_k^{nucl} + P_k^{cond} + P_k^{phot} + \frac{\partial}{\partial x_j} K_{jj} \frac{\partial \varphi_k}{\partial x_j}. \quad (3)$$

где $j = \overline{1,3}$ ($u_1 = u$, $u_2 = v$, $u_3 = w$), ($x_1 = x$, $x_2 = y$, $x_3 = z$); (u, v, w)- компоненты вектора скорости ветра в направлении x, y, z , соответственно; C_i , $i = 1, \dots, N_g$, $\varphi_k = 1, \dots, N_a$ - концентрация газовых примесей и аэрозолей; N_g , N_a - числа газовых компонент и аэрозольных фракций, соответственно; w_g - скорость гравитационного оседания; F^{gas} - и F^{aer} - источники газовых примесей и аэрозолей (например, пожары или заводские трубы); P^{nucl} , P^{cond} , P^{coag} и P^{phot} - нелинейные операторы нуклеации, конденсации, коагуляции и фотохимической трансформации, соответственно. При этом, уравнения (1)-(2) рассматриваются в области $D_t = D \times [(0, T)]$, $D = \{(x, y, z); x \in [-X, X], y \in [-Y, Y], z \in [z_0, H]\}$, где H - верхняя граница области интегрирования. Для учета орографии в модели используется обобщенная система координат $(\bar{x}, \bar{y}, \sigma)$, связанная с рельефом местности $x \equiv \bar{x}$, $y \equiv \bar{y}$, $\sigma = \frac{z - \xi(x, y)}{H - \xi(x, y)} \hat{H}$, где H и \hat{H} - высота нижней и верхней границы

соответственно в z - и σ - системе координат, а $\xi(x, y)$ - функция, описывающая рельеф [1].

Начальные условия задаются в виде:

$$C_i(x, y, z) = C_i^0(x, y, z); \quad \varphi_i(x, y, z) = \varphi_i^0(x, y, z), \quad \text{при } t = 0. \quad (4)$$

Краевые условия на боковых границах области имеют следующий вид:

$$\begin{aligned} \varphi_i|_{\Omega} &= \varphi_i^b, \text{ есть } u_n < 0, \\ \frac{\partial \varphi_i}{\partial n}|_{\Omega} &= 0, \text{ есть } u_n \geq 0, \end{aligned} \quad (5)$$

где Ω - боковая поверхность, n - внешняя нормаль к Ω , u_n - нормальная компонента вектора скорости.

Уравнения турбулентной диффузии (2)-(5) решаются по методу покомпонентного расщепления [12, 16]. Сложности вызваны необходимостью расчета коэффициентов турбулентной диффузии в зависимости от состояния атмосферы [7,17].

Перенос многокомпонентных газовых примесей рассчитывается с учетом микрофизических процессов вымывания осадками и туманами. Удаление микропримесей газов из воздуха осуществляется за счет различных механизмов. Они включают в себя абсорбцию и осаждение на поверхность земли, самоочищение в процессах образования облаков и туманов, вымывание осадками и т.д. [13].

Исходной информацией для инициализации моделей является метеорологическая информация и данные о характеристиках источника.

Для расчета влажного вымывания примесей атмосферными осадками в модели используются данные радиолокационных наблюдений. С помощью метеорологических локаторов ДМРЛ-С в аэропортах через равные промежутки времени (10 мин) строятся карты распределения облаков и осадков на большой площади [18]. Данные об интенсивности осадков позволяют рассчитывать поток примесей на поверхность земли в результате вымывания.

На рис. 1 представлены данные получаемые новым доплеровским метеорологическим радиолокатором ДМРЛ-С [18].

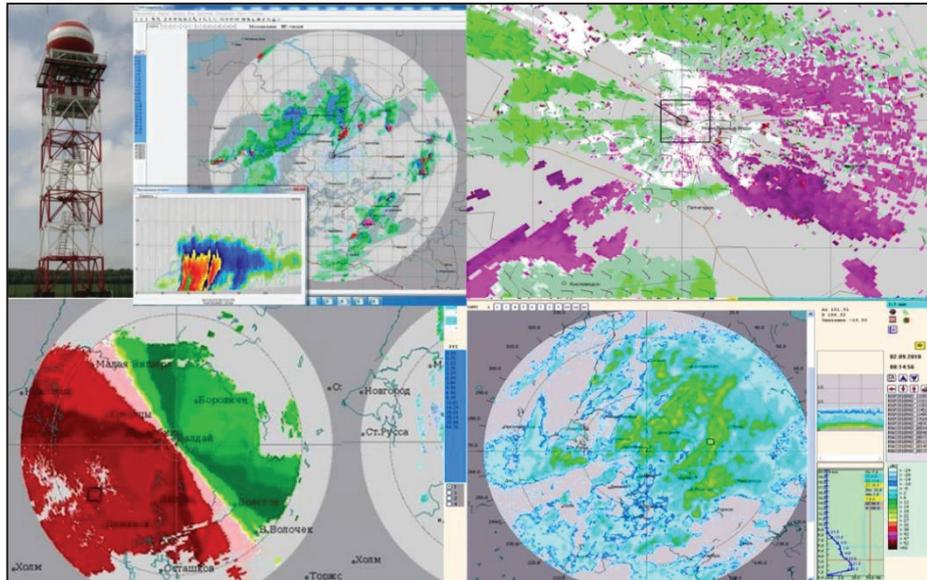


Рис. 1. Карта горизонтального ветра по данным ДМРЛ-С.
Стрелками указано направление и скорость ветра.

Модель позволяет по реальным данным поля ветра и облачности в атмосфере, получаемым в результате обработки данных зондирования, например, карт горизонтального ветра и отражаемости, рассчитывать распространение примесей от различных источников. Использование данных доплеровских ДМРЛ-С значительно улучшает анализ экологической обстановки в исследуемом районе.

На основе построенной модели проведены предварительные расчеты при различных метеорологических данных. Моделировался стационарный источник. Была выбрана область, представляющая собой прямоугольный пространственный параллелепипед со сторонами $12 \times 12 \times 10$ км. Ось Y направлена на север, ось X – на восток. В области заданы метеорологические параметры по варианту GFS [14]. Контрольное время t_1 составляло 5 мин (300 с), t_2 составляло 10 мин (600 с) время t_3 составляло 20 мин (1200с). На рис. 2. представлены результаты тестовых расчетов – приведены изоповерхности концентрации примеси заданные моменты времени. Облако примеси переносится ветром и расширяется вследствие турбулентной диффузии, максимальная концентрация частиц со временем нарастает.

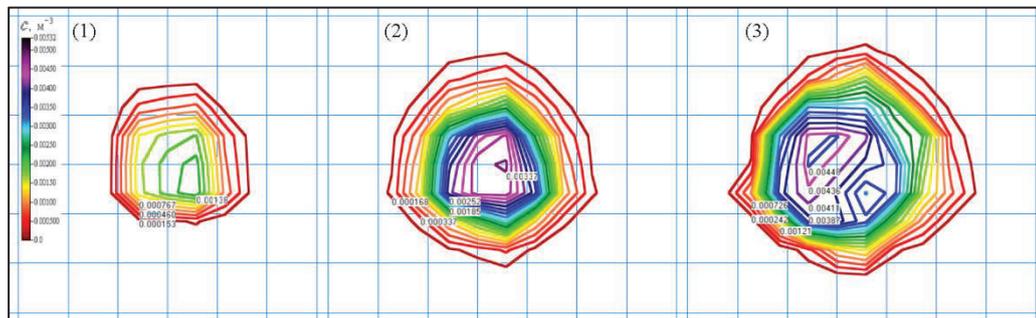


Рис. 2. Изоповерхности концентрации частиц в моменты времени $t_1=5$ (1), $t_2=10$ (2) и $t_3=20$ мин (3).

Тестовые расчеты показали высокую точность расчетных схем, используемых в модели. Модель позволяет по реальным данным поля ветра и облачности в атмосфере рассчитывать распространение примесей от различных источников.

Результаты расчетов, выполненных с использованием различных начальных данных, сильно отличаются друг от друга. Изменение структуры ветра в атмосфере приводит к существенному изменению характера взаимодействия облака примеси с атмосферой. Большое значение имеет прогнозирование возможности резкого повышения уровня концентрации примесей в воздухе. Оно может быть обусловлено неблагоприятными для рассеивания примесей метеоусловиями. При прогнозировании условий возрастания концентраций загрязняющих веществ в атмосфере, помимо погодных условий, необходимо учитывать особенности режима выбросов, связанные с временем года, временем суток, днями недели и др. [61]. Использование выходных данных глобальных моделей атмосферы в качестве предикторов при моделировании облаков позволяет более адекватно воспроизводить эволюцию конвективных облаков при естественном развитии и при активном воздействии.

Использование выходных данных глобальной модели NOAA Global Forecast System в качестве входных данных моделей облаков позволяет сэкономить время для оперативного применения последних. Также использование данных глобальных моделей в определенной мере восполняет дефицит данных аэрологического зондирования. Существенное значение имеет тот фактор, что данные глобальных и мезомасштабных моделей становятся доступными для все более широкого круга специалистов и пользователей.

С целью получения более полных прогностических полей метеорологических параметров применяется совмещение данных глобальной системы прогнозов (GFS) и данных дистанционных наблюдений метеорадиолокаторами [6].

Пример расчета распространения легкой примеси представлен на рис.3. Вертикальное распределение термодинамических параметров атмосферы и другие метеопараметры построены по данным Глобальной системы GFS. С применением метеорологических данных по КБР проанализированы условия формирования предельно допустимых уровней загрязнения окружающей среды от техногенных источников (пожары, аварии и др.). Получено, что потоки примесей на поверхность за счет сухого осаждения и вымывания осадками при пожарах нефтехранилищ на расстояниях более 50 км в целом невелики за времена в несколько часов. Накопление окислов за трехдневный период пожаров нефтехранилищ более существенно, и может составлять $0,2 \text{ мг/м}^2$ на расстояниях 50-100 км при рассмотренных метеорологических параметрах.

Впервые реализована модель, позволяющая рассчитывать распространение облака ядовитых газов в результате разрушения хранилища. С помощью модели проведена количественная оценка загрязнения окружающей среды на расстояниях до 300 км с учетом поглощения газов и вымывания туманами и осадками. Анализ выполнен при метеоусловиях полученных на АМСГ Нальчик и МС Прохладная. По результатам расчетов величина потоков хлора и аммиака на подстилающую поверхность при рассмотренных объемах выбросов на расстояниях свыше 50 км незначительна за интервалы времени в 2-3 суток. Использование комбинированных данных значительно улучшает анализ экологической обстановки в исследуемом районе.

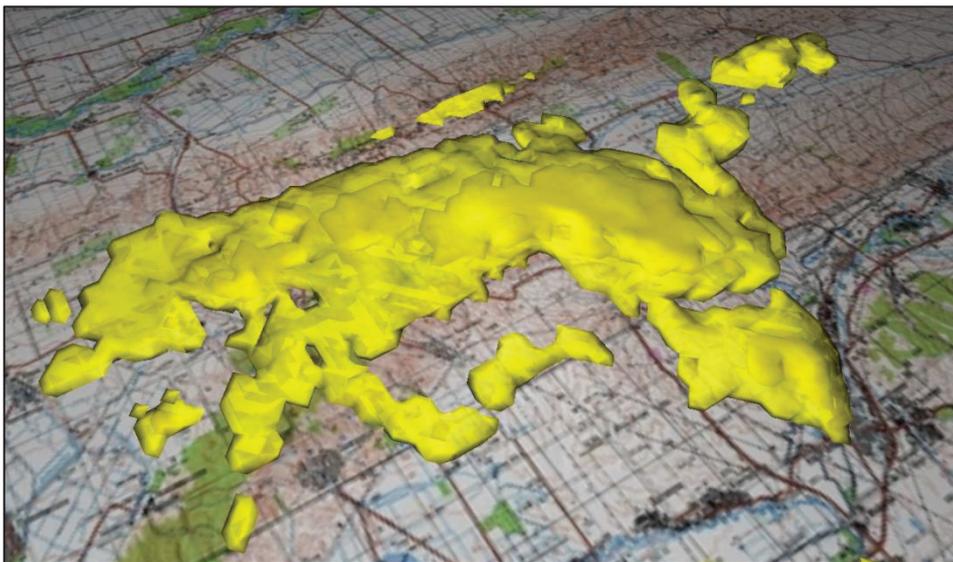


Рис. 3. Изоповерхности концентрации примеси от нескольких стационарных источников в момент времени $t=45$ мин.

Над участками земной поверхности, имеющими разную температуру, температура воздуха также различна, т.е. формируются горизонтальные температурные контрасты. Температурные контрасты, возникающие таким образом в атмосфере, могут распространяться до высот в несколько сотен метров. Над теплым участком земной поверхности, в более прогретом воздухе, на некоторой высоте, атмосферное давление будет выше, чем над холодным участком в более холодном воздухе, т.е. появятся горизонтальные барические градиенты. Под их влиянием развиваются воздушные течения, в том числе и мезомасштабные.

Главным фактором, влияющим на распространение и концентрацию примесей, является ветер [53, 70]. Характер рассеивания и переноса примесей существенно зависит от скорости ветра. Причем влияние скорости ветра на рассеивание примесей зависит от типов источников выбросов. Для низких источников выбросов максимальная концентрация достигается при слабых ветрах от 0 до 1 м/с за счет скопления примесей в приземном слое. В случае, когда источник расположен внутри штилевого слоя, исходя из результатов интегрирования уравнения диффузии, следует, что при фиксированной высоте источника концентрация неограниченно возрастает. В городах с многочисленными низкими источниками и обилием транспорта рост концентрации происходит при уменьшении скорости до 2 м/с [65]. Большое влияние на содержание примесей в атмосфере оказывает температура воздуха. При понижении температуры, возникающая разность температур между выбросами и окружающим воздухом, приводит к большему вертикальному подъему примесей и снижению их действия на приземный слой атмосферы. Немаловажную роль в формировании уровня загрязнения воздуха играет солнечная радиация. Вещества, поступающие в атмосферу от источников выбросов при высокой интенсивности солнечной радиации, в результате фотохимической реакции трансформируются в различные вторичные продукты, которые часто обладают более токсичными свойствами. Для начала фотохимической реакции под влиянием солнечной радиации достаточно невысоких начальных концентраций примесей, которые могут создать потенциальные возможности для формирования высоких уровней загрязнения воздуха [10].

Существенное влияние на изменение концентрации примеси могут оказывать естественные облака, осадки и туманы. Процесс захвата частиц примеси каплями дождя уменьшает ее концентрацию в воздухе и увеличивает на земной поверхности. Скорость изменения частиц примеси во времени пропорциональна произведению концентраций частиц и капель [47]:

$$\frac{dn}{dt} = -K(r_i, R_k)n_i N_k, \quad (6)$$

где n_i и N_k – соответственно число частиц примеси и капель (дождя, тумана, облака) радиусом r_i и R_k в 1 см³; $K(r_i, R_k)$ – коэффициент пропорциональности, в общем случае зависящий от радиусов r_i и R_k частиц и капель. В зависимости от размеров частиц примесей, радиусы которых заключены в диапазоне от 10⁻⁷ до 10⁻³ на захват частиц аэрозоля оказывают влияние многие факторы: броуновская и конвективная диффузия, турбулентный обмен, поляризационные эффекты, гидродинамическое и электростатическое воздействие. Изменение концентрации примесей также зависит от такой характеристики, как время жизни частицы, чем дольше время жизни частицы тем выше концентрация примеси. При исследовании влияния осадков на концентрацию загрязняющих веществ, отмечается, что после их окончания редко встречаются повышенные концентрации []. С увеличением количества выпавших осадков возрастает степень очищения воздуха, вместе с этим можно сделать заключение, что осадки уменьшают фоновое загрязнение воздуха, являющиеся результатом суммарного действия всех источников примесей.

Накопление примесей в атмосфере, обусловленное слабыми ветрами и инверсиями, усиливается в условиях туманов. Результаты теоретических расчетов [18], показывают, что в туманах наблюдается эффект аккумуляции примесей из выше - и нижележащих слоев. Вследствие этого эффекта возрастает концентрация примесей в воздухе и каплях, находящихся в тумане. Водные капли, поглощая примеси, образуют новые более вредные вещества.

При наличии инверсии и тумана содержание примесей на 20-30% больше, чем только при тумане, а через 6 часов после начала тумана при наличии инверсии это различие составляет 30-60% [10].

При выбросе газов необходимо учитывать высоту расположения источника над поверхностью земли, скорость выброса, общее количество газа, его температуру и скорость распространения. При этом для оценки загрязненности атмосферы важно знать состав и массу выбросов. Все эти данные могут быть получены с помощью измерительной техники [22, 45, 56]. Значительно сложнее обстоит дело с выяснением условий переноса выбросов. В то время как перенос пыли в первую очередь зависит от размеров и плотности частиц, а также от перемещения воздушных потоков, распространение газов в основном определяется их растворимостью в воде и способностью к химическому взаимодействию с компонентами атмосферы. Их наличие в атмосфере зависит от того, ограничивается ли перенос 100-километровой зоной или распространение принимает глобальный характер. Например, среди газов, имеющих тенденцию к глобальному распространению, можно назвать CO_2 , в то время как SO_2 и NO_2 , сохраняются в атмосфере от нескольких дней до нескольких недель. Этим определяется значительное различие концентраций загрязнений в местностях, подверженных действию выбросов, по сравнению с теми, где выбросы отсутствуют.

Перенос тесно связан с метеорологическими условиями и особенностями земной поверхности. Направление переноса выбросов определяется направлением ветра, а высота подъема выбросов его скоростью. С увеличением скорости ветра перемешивание газов с окружающим воздухом становится все более интенсивным, что приводит к разбавлению выбросов. В то же время большая скорость ветра препятствует подъему выбросов, ограничивая их распространение в вертикальном направлении. Аналогично на направление распространения выбросов влияет и температура отдельных слоев воздуха. При нормальной стратификации атмосферы выбросы могут беспрепятственно подниматься вверх, в случае инверсии - их подъем ограничен. Инверсия приводит к увеличению концентрации выбросов, в результате чего при достаточной солнечной радиации может наблюдаться образование смога.

Выводы и рекомендации

Разработана математическая модель распространения примесей в локальной области с учетом фактических или прогнозных полей метеопараметров. Разработаны алгоритмы и программные модули реализации модели на ЭВМ. Внедрена схема применения данных ДМРЛ-С для построения поля ветра в расчетной области. Разработаны алгоритмы и программные модули применения данных глобальной прогностической модели GFS для построения поля ветра в расчетной области. Опробована методика применения результатов расчетов термодинамических параметров атмосферы по глобальной модели GFS для решения прикладных задач.

Показана эффективность сочетания данных из различных источников для инициализации в развитии моделей загрязнения атмосферы.

Выделены и проанализированы основные факторы влияющие на распространение и концентрирование примесей.

Учет метеорологических параметров позволяет более детально исследовать загрязнение воздуха. Проведен численный анализ распространения вредных примесей в ближней зоне в районе загрязнения от стационарных источников, при различных метеорологических параметрах, в том числе, при сдвиге ветра в атмосфере.

Проанализированы условия формирования предельно допустимых уровней загрязнения окружающей среды от техногенных источников (пожары, аварии и др.). Если для высоких источников неблагоприятным является сочетание опасной 3-5 м/с скорости ветра и неустойчивой стратификации, то для низких источников эти условия не представляют опасности. Опасным для низких источников является сочетание приземных инверсий и штиля, когда наземные концентрации от высоких источников будут минимальными.

Численные методы позволяют дать более точные результаты за счет учета изменения выбросов от источника со временем и наличие сведений об ожидаемых характеристиках метеоусловий, и режимах выбросов от источников. Однако можно

утверждать, что прогнозы будут эффективны только в том случае, когда реальна возможность регулирования или полного прекращения выбросов, а также избежание их воздействия в случае неблагоприятной метеорологической обстановки.

Таким образом, в работе на основе численного моделирования исследован ряд вопросов мезомасштабного распространения примесей в облачной атмосфере, имеющих важное прикладное значение для прогноза опасных экологических ситуаций.

Полученные результаты способствуют совершенствованию методов расчета загрязнения воздуха в локальной зоне. Предложенная в работе модель и методы могут применяться для разработки научно-обоснованного прогноза по концентрации загрязняющих веществ и в дальнейших прикладных исследованиях по изучению метеорологических аспектов распространения загрязняющих веществ в приземном слое. При создании информационных систем обеспечения метеорологической и экологической безопасности жизнедеятельности людей возможность расчета распространения загрязнений и количественная оценка их потоков на подстилающую поверхность, позволяют прогнозировать развитие неблагоприятных ситуаций, и при необходимости принимать меры по недопущению вредного воздействия на людей, фауну и флору.

Следует также отметить, что результаты численного моделирования формирования микроструктуры градовых облаков и формирования электрического заряда в них показали, что в облаках происходят сложные взаимодействия различных физических процессов, роль которых велика и пренебрегать которыми нельзя. То же самое можно сказать и о физике распространения газовых примесей и аэрозолей. Очевидно, растворяясь в облачных каплях, примеси начинают влиять на дальнейшее развитие микрофизических процессов. Эти вопросы требуют отдельного рассмотрения.

Литература

1. Алоян А.Е., Пененко В.В., Козодеров В.В. Математическое моделирование в проблеме окружающей среды//в кн. Современные проблемы вычислительной математики и математического моделирования, т.2, Математическое моделирование. М.: Наука, 2005. С. 279-351.
2. Белых А.Б., Леготин Д.Л., Сухов А.К. Современные компьютерные модели распространения загрязняющих веществ в атмосфере // Вестник КГУ им. Н.А. Некрасова, 2013. Т. 19. № 1. С. 14-19.
3. Берлянд М.Е. Прогноз и регулирование загрязнения атмосферы. Л.: Гидрометеоздат, 1985. 265 с.
4. Кагермазов А.Х. Валидация выходных данных Глобальной Системы Прогнозов GFS (Global Forecasts System) с результатами аэрологического зондирования // Известия КБНЦ РАН. 2014. №3 (59) С. 32-36.
5. Керимов А.М., Корчагина Е.А., Шаповалов А.В., Шаповалов В.А. О распространении атмосферных примесей в горно-степной зоне. // Известия Вузов. Северо – Кавказский регион. Естественные науки, 2007. №3. С.86-89.
6. Марчук Г.И. Математическое моделирование в проблеме окружающей среды. М.: Наука, 1982.- 319 с.
7. Пьянова Э.А., Фалейчик Л.М. Информационно-вычислительная технология для сценарных оценок динамики и качества атмосферы // Вычислительные технологии, 17(1), 2012. С. 109-119.
8. Рязанов В.И., Шаповалов А.В., Шаповалов В.А. Трехмерная численная модель распространения примесей в атмосфере с учетом локальных метеорологических условий // Естественные и технические науки, 2016. № 10 (100). С. 27-34.
9. Шварц К.Г., Шкляев В.А. Численное моделирование атмосферных мезомасштабных процессов переноса многокомпонентной примеси при торфяном пожаре // Вычислительная механика сплошных сред, 2012. Т. 5. № 3. С. 274-283.
10. Dayan U. et al. Atmospheric pollution over the eastern Mediterranean during summer—a review //Atmospheric Chemistry and Physics. 2017. Т. 17. №. 21. С. 13233.
11. Rocha E. M., Curado F. Multiple Scale Modeling of Geophysical Processes //Mathematical Geosciences. – 2018. – Т. 50. – №. 5. С. 491-493.

12. *Rolph G., Stein A., Stunder B.* Real-time environmental applications and display system: Ready //Environmental Modelling & Software. 2017. Т. 95. С. 210-228.
13. *Rood A. S.* Performance evaluation of AERMOD, CALPUFF, and legacy air dispersion models using the Winter Validation Tracer Study dataset //Atmospheric Environment. 2014. Т. 89. С. 707-720.
14. *Li X. X. et al.* Recent progress in CFD modelling of wind field and pollutant transport in street canyons //Atmospheric Environment. 2006. Т. 40. №. 29. С. 5640-5658.